



TITLE:

典型元素を活用した機能性材料の開発

AUTHOR(S):

吾郷, 友宏

CITATION:

吾郷, 友宏. 典型元素を活用した機能性材料の開発. 京都大学化学研究所
スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 69-69

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230769>

RIGHT:

典型元素を活用した機能性材料の開発

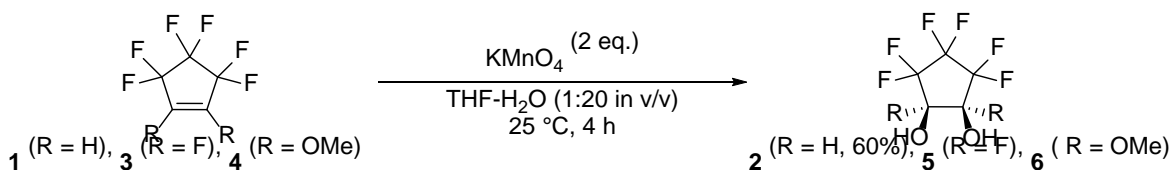
Development of functional materials by taking advantage of main group elements

茨城大学工学部生体分子機能工学科 吾郷 友宏

研究成果概要

我々は最近、HFC 溶剤の一つである 3,3,4,4,5,5-ヘキサフルオロシクロペンテン(**1**)を過マンガン酸カリウムで酸化することで、ポリフルオロ環状 1,2-ジオール **2** が得られることを見出しており (Scheme 1)、**2** のフッ素化ポリマー合成への利用を行っている。一方、**1** と類似した構造を有するヘキサフルオロシクロペンテン誘導体 **3** および **4** では、対応するジオール **5** および **6** は得られず原料回収となっており、置換基 R によってアルケンの反応性に顕著な差異が見られた。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、ヘキサフルオロシクロペンテン誘導体 **1**, **3** および **4** の反応性について理論化学的検討を行った。

Scheme 1



ヘキサフルオロシクロペンテン誘導体 **1,3** および **4** の構造最適化は、*Gaussian 16* を用いて B3PW91/6-31G(d) レベルで行った。最適化構造について、NBO6.0 を用いて Natural population analysis (NPA) 電荷を計算したところ、酸化反応が進行した **1** に比べ、**3** および **4** では、アルケン炭素原子の電子密度が低下していることがわかった (Table 1)。**3** および **4** では、フッ素置換基またはメトキシ基のために、アルケン部位の電子密度が低下したものと考えられる。一方、**1** の HOMO は **3** および **4** に比べ低下していた。以上より、**3** および **4** ではアルケン部位の電子密度が低下しているため、求電子的な過マンガン酸イオンとの反応が進行しなかったものと考えられる。現在、**3** および **4** と過酸化水素などの求核的な酸化剤との反応の検討を行っている。

Table 1. Summary of the theoretical calculations

	Q^a/e	HOMO energy level/eV
1	-0.26	-8.96
3	+0.31	-8.48
4	+0.20	-6.64

^aNPA charge of the alkene carbon atoms.

発表論文 (謝辞あり)

T. Agou, R. Ohata, H. Fukumoto and T. Kubota, *submitted*.